
科学家预测极端环境下纳米限域二维冰相行为和质子动力学

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/25845.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

科学家预测极端环境下纳米限域二维冰相行为和质子动力学。北京时间2024年1月22日，香港城市大学讲席教授曾晓成、北京师范大学教授朱重钦、宾夕法尼亚大学讲席教授Joseph S. Francisco等团队在Nature Physics期刊上发表了题为 Rich Proton Dynamics and Phase Behaviors of Nanoconfined Ices的研究论文。

通过深入的理论计算研究，他们揭示了极端环境下纳米限域二维冰相与质子动力学的多样性和丰富性，为相关领域的基础研究提供了新的视角和见解。

受限于纳米尺度环境的水普遍存在于地质、行星、生物细胞以及纳米流体通道中。在过去的几十年里，研究者们通过不断努力探索与设计，成功制造人工纳米尺寸的管道，并深入研究纳米受限低维水和冰的特性。尽管取得了一些显著的成果，然而我们对极端环境下纳米受限水和冰的理解仍然有限。

在行星内部和广阔的宇宙中，极端环境普遍存在。在一些星体内极高压条件下，我们所熟知的冰可以转变成为超离子冰形态，这种形态同时兼具固体和液体的特性，比如被视为天王星和海王星这类含冰巨行星内部的组成部分。然而，在实验室中实现纳米受限尺度下的极端环境具有巨大的挑战性。

理论计算团队成功结合了机器学习力场、固体结构搜索、路径积分分子动力学模拟和元动力学的计算方法，对极端环境下纳米限域高压二维冰相进行了深入研究。他们利用自己训练的机器学习力场，通过大规模的结构搜索和自由能计算，预测了近十种二维单层双层冰相结构。图1展示了这些结构，包括具有类似体相冰ice X中O-H-O对称性的之子型-褶皱单层冰(ZZ-pMI)，双层铁电冰相 (BL-iVII-FE和BL-iVII-FE) 以及首个由H5O2+离子构成的部组分离子双层冰(BL-iVII-Zundel)。

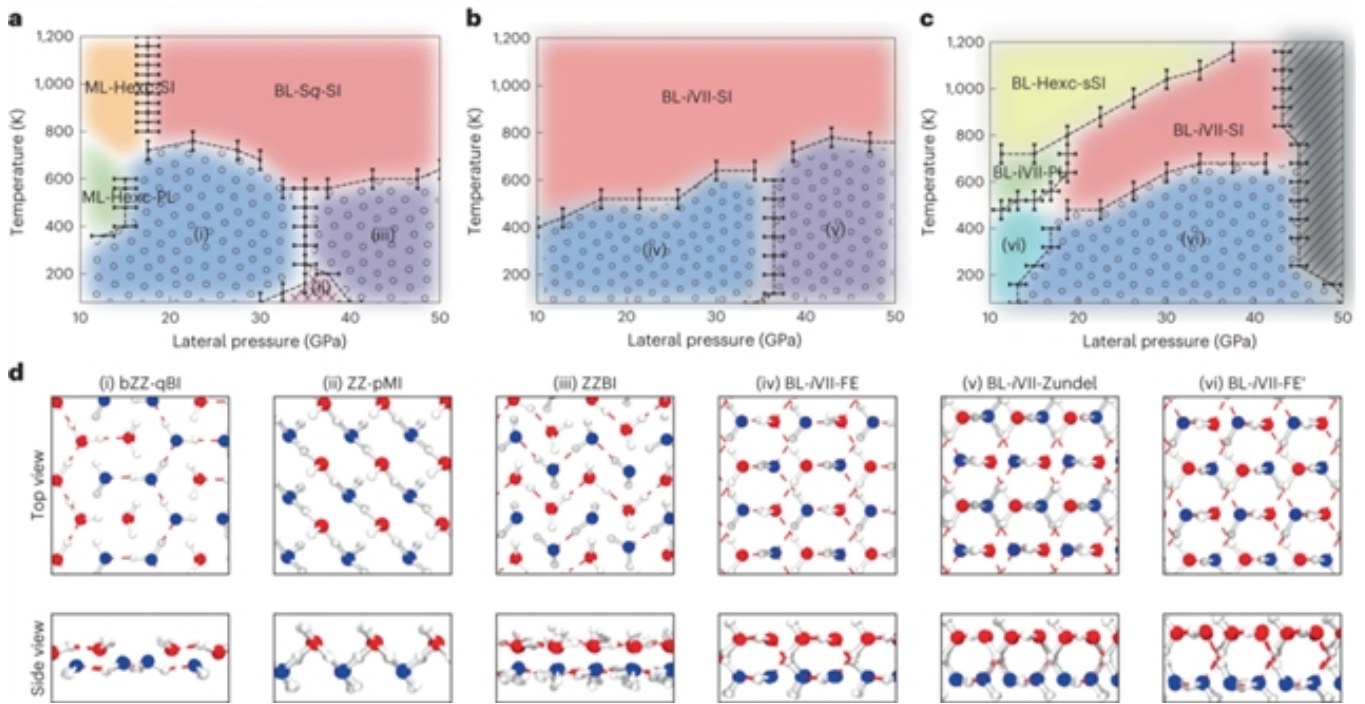


图1：纳米受限二维冰在不同受限条件下的相图

限域二维冰的氢键结构具有独特的各向异性，这一特性使其与三维体相冰截然不同。正是由于这种特殊的氢键各向异性，核量子效应在纳米限域二维冰中可以引发一系列丰富的质子动力学行为。图2清晰地展示了不同方向上质子行为的差异性：在之子型分支-双层冰（bZZ-qBI）相中，质子在某个方向上参与氢键的形成，而在另一个方向上，质子在两个氧原子之间进行跳跃；在之子型-褶皱单层冰相中，质子在某个方向上形成OH悬挂键，而在另一个方向上，它们局域在对称O-H-O结构中；在褶皱双层冰（ZZBI）相中，三个方向分别展现出质子形成OH悬挂键、质子在两个氧原子跳跃行为以及本杰明L型缺陷的现象。此外，高温条件下，理论计算人员预测质子绕氧原子转动（塑性双层冰相）和非局域质子运动（超离子双层冰相）等特殊行为。

图2：纳米受限二维冰中展现的质子分布

除了上述发现，研究团队还发现核量子效应对质子跃迁行为的显著影响，导致了超快质子跃迁现象的产生。在相同压强下，二维冰中的质子跃迁速率比三维体相冰中的速率快一个数量级以上。此外，研究进一步揭示了二维双层冰层内和层间的质子相互作用对质子跃迁的促进作用。通过调控纳米受限尺度，理论计算团队成功实现了对双层冰层间质子跃迁和每层内质子跃迁的精细调控。

最后，研究人员深入探讨了一系列全新的二维双层冰融化过程，并取得了若干重大基础科学发现。他们的计算揭示了二维冰从通常的分子固相 塑性相 超离子固相 超离子液相其中包括连续两个二阶相变的路径，以及从分子固相 塑性相 滑动超离子相 超离子液相其中包括连续三个二阶相变的路径。这些二维双层冰融化过程结果不仅验证了KTHNY二维固体融化物理机制，还首次预测了层间滑动超离子双层冰的存在。这些发现为理解二维固体融化过程提供了全新的物理视角，极大的丰富了对二维固体融化行为的认识，同时也拓展了二维材料物态转变的理论基础。

综上所述，这项理论计算研究系统地预测了纳米限域尺度下一系列复杂的二维冰相结构，丰富了质子动力学行为，以及二维冰的融化机理。这些突破性的研究成果不仅深化了对水和冰这一大自然基本物质的基础科学认识，而且为水和冰在众多科学技术领域的研究及应用提供了坚实的理论基础。

香港城市大学博士后江健为本论文的第一作者，北京师范大学朱重钦教授、宾夕法尼亚大学Joseph S. Francisco教授与香港城市大学曾晓成教授为论文的共同通讯作者。该工作得到了国家重大研究计划、香港特区「杰出创科学人计划」和研究资助局的资助。（来源：科学网）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41567-023-02341-8>

作者：曾晓成等 来源：《自然—物理学》

更多科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发